

インディゴジスルホン酸を対アニオンとする BEDT-TTF 塩、

(BEDT-TTF)₃(インディゴジスルホン酸)・(H₂O)の構造と物性

(阪大院理) ○山延 謙斗・坪 広樹・中澤 康浩

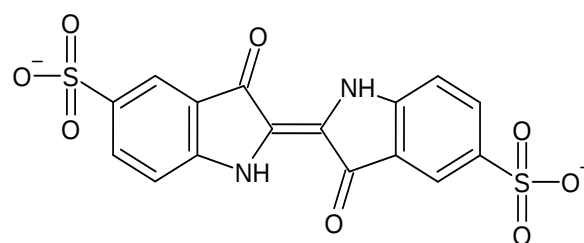
Structure and properties of BEDT-TTF-based salt with indigodisulfonate, (BEDT-TTF)₃(Indigodisulfonate)・(H₂O) (*Graduate School of Science, Osaka University*) ○Kento Yamanobe, Hiroki Akutsu, Yasuhiro Nakazawa

We have prepared the title BEDT-TTF salt by electrocrystallisation using indigo carmine as an electrolyte, which is expected to become a dipole oscillator. BEDT-TTF trimer possessing a twisted stack and indigodisulfonate stack alternatively along the *b* axis. The outer molecules of the trimer have much larger charge(+0.82) than that of the inner molecule(+0.36).

Keywords : Organic Conductors; BEDT-TTF; dipole oscillator

インディゴなどの色素分子は分子全体に渡って広い共役系を持ち、導体内に導入すると振動分極を起こすことが期待できる。振動双極子を有する分子を有機導体に導入することで、振動分極と伝導電子との相互作用によってより高温の有機超伝導体の実現が期待されている。本研究では、インディゴジスルホン酸に注目し、今回は、BEDT-TTF 分子との電解を行うことにより表題の結晶を得ることが出来たので報告する。

インディゴカーミンと BEDT-TTF 分子を THF 18 mL、EtOH 2 mL、H₂O 1 mL の混合溶媒中で電解を行ったところ、黒色針状結晶が得られた。構造解析の結果、組成は(BEDT-TTF)₃(Indigodisulfonate)・H₂O (**1**)であった。Fig.1 に結晶構造を示す。晶系は triclinic、空間群は *P* $\bar{1}$ であった。*b* 軸方向に沿って BEDT-TTF 3 量体とインディゴジスルホン酸が交互にスタックしていたが、この 3 量体内で BEDT-TTF はねじれてスタックしており、3 量体の内側(+0.36)より外側(+0.82/規格化後)の分子の方がずっと大きな価数を有していた。また、BEDT-TTF 分子は *a* 軸方向に沿って横方向には接触していた。予備的な伝導度測定の結果、半導体的挙動を示し、 ρ_{RT} = 2.42 $\Omega \cdot \text{cm}$ 、 E_a = 0.053 eV であった。詳しくは当日報告する。



Indigodisulfonate

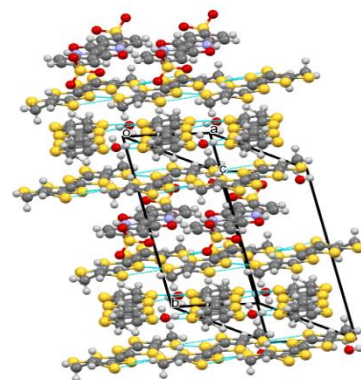


Fig.1. 結晶 **1** の結晶構造(点線は S...S 接触(< 3.70 Å))

(*a* = 6.6011(3), *b* = 15.2343(6), *c* = 16.2938(8) Å, α = 79.440(4), β = 80.204(4), γ = 77.779(4)°, *Z* = 2, *V* = 1559.52(13) Å³, *R* = 8.80 %, *T* = 290 K)